



Universidad Zaragoza

FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA

TRABAJO FIN DE GRADO:

EXTENSIONES AUTOADJUNTAS DEL HAMILTONIANO DE COULOMB

Autor:
Enrique Ramírez Díaz

Dirigido por:
Dr. José Vicente García Esteve

Junio, 2019

Índice

1. Introducción.	4
2. Operadores autoadjuntos en Mecánica Cuántica, breve repaso.	6
2.1. Extensiones autoadjuntas de un operador A	9
3. Extensiones autoadjuntas del Hamiltoniano de Coulomb.	12
4. El átomo de hidrógeno con interacción puntual.	19
5. Conclusiones	25

1. Introducción.

Uno de los problemas más relevantes en el desarrollo de la Mecánica Cuántica es el problema de Coulomb, o en su versión más sencilla, el de obtener el espectro discreto del átomo de hidrógeno. De hecho, el que las reglas de cuantificación de Schrödinger aplicadas a este problema explicasen su espectro discreto y la existencia de las transiciones correspondientes a la serie de Balmer dio en su momento un espaldarazo a la teoría de Schrödinger. Como es sabido, en la obtención de este espectro es crucial tomar como condiciones de contorno para las funciones de onda en coordenadas esféricas que $\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi(r) = 0$ y que, en cambio, cerca del origen $\Psi(r) = a + br + O(r^2)$, donde a y b son constantes, es decir, que las funciones de onda se anulan suficientemente rápido en el infinito y que son regulares en el origen. Sin embargo, podría pensarse que esta condición de regularidad es excesiva ya que también hay funciones de onda que aunque no son regulares cuando $r \rightarrow 0$ (es decir, divergen), su divergencia es lo suficientemente suave como para que sean normalizables. Un ejemplo de tales funciones en tres dimensiones es cualquier función continua que se anula lo suficientemente rápido cuando $r \rightarrow \infty$ y que en el origen se comporta como $\Psi(r) = \frac{a}{r} + b + O(r)$, con a y b constantes. En ese caso, $\int_0^\infty |\Psi(r)|^2 r^2 dr < \infty$ y dichas funciones son aceptables en nuestro espacio de Hilbert.

Por tanto, es legítimo preguntarse si existen otras autofunciones del espectro discreto del Hamiltoniano de Coulomb, cuyo comportamiento sea distinto del que se considera en las soluciones habituales. Obviamente, hacerse esa pregunta es lo mismo que preguntarse si existen otras extensiones autoadjuntas de ese Hamiltoniano y ese precisamente es el problema que trataremos de abordar en este trabajo.

Las posibles extensiones autoadjuntas de Hamiltoniano de Schrödinger con potenciales centrales singulares en el origen se han estudiado en [1][2], basándose en comportamientos de la función de onda en un entorno del origen. Aquí estudiaremos el caso en el que el potencial es el de Coulomb usando la técnica de los índices de defecto de Von Neumann [3][4] tratando de obtener dichas extensiones y estudiando en qué casos alguna de esas coincide con la habitual. Para ello, en el Capítulo 2 haremos un breve repaso de algunos de los conceptos matemáticos sobre operadores lineales en espacios de Hilbert que se necesitarán después. El Capítulo 3 está dedicado a la obtención de los índices de defecto del Hamiltoniano de Coulomb y al establecimiento de todas las posibles extensiones autoadjuntas del mismo, en particular a ver que en el subespacio de estados con momento angular $l \neq 0$ solo hay una única extensión posible y esta es la habitual (funciones regulares en el origen), pero que en el subespacio de estados con momento angular $l = 0$ hay infinitas extensiones autoadjuntas caracterizadas por un parámetro real ν . Además, veremos cómo en el caso $\nu \rightarrow \infty$ se vuelve a obtener la extensión habitual mientras que para $\nu < \infty$ las diferentes extensiones autoadjuntas se corresponden con tener una interacción puntual en el origen. El Capítulo 4 está dedicado a aplicar todo lo anterior al estudio del átomo de hidrógeno con una interacción puntual, a obtener su espectro y a fijar el parámetro de la extensión de forma que se corresponda con haber incluido en el Hamiltoniano un término de Darwin. También se comentará brevemente cómo el considerar extensiones $\nu < \infty$ rompe la simetría $SO(4)$ original del problema (y que es la responsable de que el espectro habitual del átomo de hidrógeno dependa solo del número cuántico n y no del momento angular l). Ahora los estados con el mismo valor de n pero con $l = 0$ y $l \neq 0$ tendrán distinta energía. Finalmente, resumiremos el trabajo en el apartado de conclusiones.

2. Operadores autoadjuntos en Mecánica Cuántica, breve repaso.

La imposibilidad de explicar de forma satisfactoria muchos fenómenos físicos observados mediante la mecánica clásica y la teoría de campo electromagnético a principios del siglo XX hizo necesario la creación de una nueva teoría con características totalmente nuevas. Dicha teoría debía introducir un nuevo formalismo matemático consistente en una serie de conceptos primitivos, unas relaciones entre estos conceptos y una ley dinámica, así como también en reglas de correspondencia que relacionan los conceptos teóricos del formalismo matemático con el mundo de la experiencia. Es decir, necesita, pues, de unos nuevos postulados que nos permitan explicar y entender la naturaleza de estas observaciones. Enunciamos los postulados de la Mecánica Cuántica a continuación [3][5]:

Postulado 1: A cada sistema físico que se pretenda describir en el marco de la Mecánica Cuántica se le hace corresponder un espacio de Hilbert, \mathcal{H} complejo y separable (admite un subconjunto denso y numerable, y por tanto una base ortonormal numerable). Un estado puro de este sistema físico en un instante de tiempo t se representa por un vector $|\psi(t)\rangle$ del espacio de Hilbert correspondiente, llamado vector estado o ket.

Con estado puro nos referimos a aquel del que disponemos la mayor información cuántica posible, entendiendo esto como el estado del sistema cuántico para el que se controlan todas las magnitudes simultáneamente medibles (o compatibles) independientes.

Postulado 2: Cada observable del sistema físico se representa en el formalismo matemático de la Mecánica Cuántica por un operador lineal autoadjunto que actúa en el espacio de Hilbert considerado.

Llamamos observables a los operadores que representan las distintas magnitudes físicas propias de nuestro sistema.

El hecho de que sea autoadjunto tiene también relevancia desde el punto de vista de que, entonces, sus autovalores son reales. Esto es de gran importancia, como veremos en el tercer postulado.

Además, estos operadores actúan en un dominio que es un subespacio denso del espacio de Hilbert, \mathcal{H} , en consideración. Esto tiene un doble motivo: porque es necesario para justificar algunas propiedades de los operadores autoadjuntos y porque así sabemos medir ese observable sobre cualquier vector del espacio de Hilbert.

Postulado 3: El único resultado posible de la medida de una magnitud física \mathcal{A} es uno de los autovalores del observable A correspondiente.

Dado que el observable A es autoadjunto, la medición de la magnitud \mathcal{A} siempre será un valor real, ya que los autovalores de un operador autoadjunto son todos reales, como ya hemos mencionado.

Si el espectro de A es discreto, y $A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$, es decir, que A tiene como valores propios el conjunto de reales $\{a_n\}$ y como vectores propios el conjunto $\{|u_n\rangle\}$, entonces sea $|\psi\rangle = \sum_n c_n|u_n\rangle$, donde los c_n son los coeficientes correspondientes a los elementos $|u_n\rangle$ de la base ortonormal de autoestados, la probabilidad de obtener el autovalor a_n al medir \mathcal{A} es:

$$\mathcal{P}(a_n) = \|\langle u_n|\psi\rangle\|^2 = \|c_n\|^2$$

Además, si se obtiene dicho a_n , el estado que describe al sistema en un momento posterior a la medida es la proyección de $|\psi\rangle$ sobre el subespacio propio de a_n normalizada. A este fenómeno se le llama colapso de la función de onda.

Siguiendo con la explicación del formalismo de la Mecánica Cuántica, hacemos ahora un inciso algebraico para introducir definiciones y aclarar conceptos:

Definición 1: Un operador A definido sobre un espacio vectorial normado se dice acotado si y solo si cumple que existe un número real positivo K tal que para cualquier vector ϕ del dominio de definición de A se cumple que $\|A(\phi)\|/\|\phi\|$ es menor que K , es decir, que

$$\exists K \in \mathbb{R} \mid \max_{(\|\phi\|=1)} \|A(\phi)\| \leq K \quad \forall \phi \in D(A)$$

Definición 2: Un operador A con dominio $D(A)$ se dice que es de dominio denso en \mathcal{H} si la clausura de $D(A)$, $\overline{D(A)}$, coincide con \mathcal{H} . Es decir, que tan cerca como queramos de cualquier elemento $\phi \in \mathcal{H}$ hay siempre un elemento de $D(A)$ y, por tanto, que para todo $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$, existe una sucesión de vectores $\{|\phi_n\rangle\}$, con $|\phi_n\rangle \in D(A)$ tal que $|\phi_n\rangle \rightarrow |\phi\rangle$.

Definición 3: Sea un operador A con dominio $D(A) \subset \mathcal{H}$, y tal que $A:D(A) \rightarrow \mathcal{H}$, se define el grafo de A como:

$$\Gamma(A) = \{(\phi, \varphi) \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \mid \phi \in D(A), \varphi = A\phi\}$$

Se dice que A es cerrado si el subespacio $\Gamma(A)$ lo es. En este caso se tendrá que si $\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n = \varphi$, y existe $\lim_{n \rightarrow \infty} A\varphi_n = \phi$, se tiene que $A\varphi = \phi$, es decir, que $\lim_{n \rightarrow \infty} A\varphi_n = A \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n$. Sin embargo, puede ocurrir que no exista $\lim_{n \rightarrow \infty} A\varphi_n$ si, por ejemplo, A no está acotado y entonces no se puede asegurar la anterior igualdad aunque A sea cerrado. Además, A se dice cerrable si el subespacio $\overline{\Gamma(A)}$, cierre de $\Gamma(A)$, es el grafo de operador \overline{A} , es decir, que $\overline{G(A)} = G(\overline{A})$. A \overline{A} se le llama la extensión mínima cerrada de A .

Definición 4: El operador A^\dagger , llamado el adjunto de A , es aquel que a todo elemento del espacio de Hilbert $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ asigna el vector $A^\dagger |\phi\rangle = |\varphi\rangle$ tal que:

$$\langle \phi | A\psi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle = \langle A^\dagger \phi | \psi \rangle \quad \forall |\psi\rangle \in D(A)$$

A^\dagger está bien definido si y solo si el dominio de A , $D(A)$, es denso en \mathcal{H} . Además, en ese caso puede verse que el operador adjunto A^\dagger es un operador cerrado.

Definición 5: Decimos que un operador A con dominio $D(A)$ denso es simétrico si se cumple que:

$$\langle A\phi | \psi \rangle = \langle \phi | A\psi \rangle \quad \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in D(A)$$

Es decir, que $D(A) \subseteq D(A^\dagger)$, por lo que cuando A^\dagger actúa en el dominio de A , coincide con A .

$$A^\dagger|_{D(A)} = A$$

Cuando dos operadores A y B cumplen esto, lo expresamos con la notación $A \subset B$, donde B es el operador de dominio mayor y se dice que B es una extensión de A .

Definición 6: Un operador A es autoadjunto si $A = A^\dagger$. Es decir, cuando aparte de ser simétrico se cumple que $D(A) = D(A^\dagger)$. Si $\overline{A} = A^\dagger$ diremos que A es esencialmente autoadjunto. Los operadores autoadjuntos definidos en \mathcal{H} tienen todos sus valores propios reales y sus subespacios propios son ortogonales, de modo que con los vectores propios se puede construir una base ortonormal completa de \mathcal{H} . En Mecánica Cuántica, como hemos mencionado, los operadores a los que asignemos magnitudes físicas deben ser autoadjuntos.

Como vemos, la diferencia esencial entre un operador simétrico y uno autoadjunto es que la simetricidad solo requiere la condición $D(A) \subseteq D(A^\dagger)$, mientras que ser autoadjunto requiere además $D(A^\dagger) \subseteq D(A)$. Muchas veces en los libros de física se supone que simétrico y autoadjunto son conceptos idénticos, pero eso solo es verdad para operadores acotados definidos sobre todo el espacio \mathcal{H} .

Para ilustrar esta distinción, veamos el caso práctico del operador posición X [3].

Sea el operador X definido en $\mathcal{H} = \mathbb{L}^2(\mathbb{R})$ por:

$$X\psi(x) = x\psi(x)$$

con dominio

$$D(X) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx < \infty \right\}$$

que es denso en \mathcal{H} . El operador X es simétrico ($X \subseteq X^\dagger$) puesto que para todo par de funciones $\psi, \varphi \in D(X)$ se cumple

$$\langle \psi | X \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi^*(x) \varphi(x) dx = \langle X \psi | \varphi \rangle$$

Una forma de probar que X es también autoadjunto es demostrar que $D(X^\dagger) \subseteq D(X)$. Considérese una función $\psi \in D(X^\dagger)$ y definamos $\psi_1 = X^\dagger \psi$, entonces:

$$\langle \psi | X \varphi \rangle = \langle \psi_1 | \varphi \rangle, \quad \forall \varphi \in D(X)$$

Luego,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [x \psi^*(x) - \psi_1^*(x)] \varphi(x) dx = 0 \quad \forall \varphi \in D(X)$$

Como $D(X)$ es denso en $\mathbb{L}^2(\mathbb{R})$, la última expresión exige que $\psi_1(x) = x\psi(x)$. Por tanto, $\psi \in D(X)$ y $\psi_1 = X\psi$, con lo que el carácter autoadjunto de X ha quedado demostrado.

Sea ahora el operador P definido en $\mathcal{H} = \mathbb{L}^2(\mathbb{R})$ por

$$(P\psi)(x) = -i \frac{d\psi(x)}{dx}$$

con dominio

$$D(P) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \psi \text{ absolutamente continua, } \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 dx < \infty \right\}$$

que contiene al conjunto $\mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ de funciones infinitamente derivables con soporte compacto y es, por tanto, denso en \mathcal{H} . Para ver que P no es acotado basta con considerar su efecto sobre las funciones $\psi_n(x) = e^{-nx^2}$. P es simétrico ($P \subseteq P^\dagger$), pues para todo par de funciones $\psi, \varphi \in D(P)$ se cumple

$$\langle \psi | P \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left[-i \frac{d\varphi(x)}{dx} \right] dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \left[-i \frac{d\psi(x)}{dx} \right]^* dx = \langle P \psi | \varphi \rangle$$

donde se ha llevado a cabo una integración por partes y utilizado que, con el dominio dado $D(P)$, ψ, φ se anulan en los límites $-\infty$ y $+\infty$ del intervalo de integración. Para probar

que P es autoadjunto bastará demostrar que $D(P^\dagger) \subseteq D(P)$. En efecto, considérese una función $\psi \in D(P^\dagger)$ y definamos $\psi_1 = P^\dagger \psi$, entonces:

$$\langle \psi | P\varphi \rangle = \langle \psi_1 | \varphi \rangle \quad \forall \varphi \in D(P)$$

se puede escribir

$$\langle \psi | P\varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x) \varphi(x) dx = i \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{d}{dx} \left[i \int_0^x \psi_1(t) dt + c \right]^* \right\} \varphi(x) dx$$

donde c es una constante arbitraria. Escogiendo $\varphi \in \mathbb{C}_0^\infty$, integrando por partes y teniendo en cuenta que φ se anula fuera de un intervalo finito, se obtiene

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\psi(x) - i \int_0^x \psi_1(t) dt - c \right]^* \left[-i \frac{d\varphi(x)}{dx} \right] = 0 \quad \forall \varphi \in \mathbb{C}_0^\infty$$

y por ser \mathbb{C}_0^∞ denso en $\mathbb{L}^2(\mathbb{R})$, el primer factor del integrando de la expresión anterior debe ser constante y, por tanto, con una elección conveniente c_0 de c se puede escribir casi doquiera que

$$\psi(x) = c_0 + i \int_0^x \psi_1(t) dt$$

de donde $\psi_1(x) = -i \frac{d\psi(x)}{dx}$. Ha quedado, por tanto, probado que $D(P^\dagger) \subseteq D(P)$ y que $P = P^\dagger$. Sin embargo, resulta explicativo notar que la situación es totalmente distinta si se toma como espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{L}^2(0, 2\pi)$, pues entonces, con la definición del operador P y el dominio

$$D(P) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \psi \text{ absolutamente continua, } \int_0^{2\pi} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 < \infty, \psi(0) = \psi(2\pi) = 0 \right\}$$

se tiene una vez más que $D(P)$ es denso en $\mathbb{L}^2(0, 2\pi)$ y la demostración de que $P \subseteq P^\dagger$ se lleva a cabo como antes. Asimismo, se prueba que si $\psi \in D(P^\dagger)$, esta función es absolutamente continua, pero no cumple necesariamente las condiciones de contorno $\psi(0) = \psi(2\pi) = 0$, por lo que $P \subsetneq P^\dagger$. Se ve así que si bien P es simétrico, no es un operador autoadjunto en este caso. Más aún, puede probarse que no es ni siquiera esencialmente autoadjunto, pues ya P es cerrado.

2.1. Extensiones autoadjuntas de un operador A

Pasamos ahora a estudiar las extensiones autoadjuntas de los operadores simétricos y su caracterización mediante la teoría de los índices de defecto de Von Neumann [4][6]. Sea un operador A definido sobre un dominio mínimo $D^{(0)}(A)$ en el que es simétrico y tal que $AD^{(0)} \subset \mathbb{L}^2(\mathbb{R})$. Podemos calcular los índices de defecto de A resolviendo la ecuación espectral

$$A^\dagger \phi_\pm = \pm i \phi_\pm$$

A la dimensión de los subespacios engendrados por las soluciones ϕ_+ y ϕ_- se les llama índices de defecto, y se les denota por d_+ y por d_- . El operador A admite infinitas extensiones autoadjuntas si y solo si $d_+(A) = d_-(A) \neq 0$, y es esencialmente autoadjunto si $d_-(A) = d_+(A) = 0$. Si $d_-(A) \neq d_+(A)$ el operador no admite ninguna extensión autoadjunta.

El método para hallar todas las extensiones autoadjuntas de un operador con $d_- = d_+ \neq 0$

parte de definir un dominio mínimo $D^{(0)}(A)$ en el que A es simétrico, de forma que $D(A^\dagger) - D^{(0)}(A)$ sea lo más grande posible. Así, se calculan ahora los índices de defecto y se construyen las isometrías entre las funciones ϕ_+ y ϕ_- definidas como $\phi_- = U\phi_+$, siendo U un operador unitario, con n^2 parámetros libres que nos caracterizarán las extensiones autoadjuntas de A , definidas como:

$$D_U(A) = \{\psi \in \mathbb{L}^2, A\psi \in \mathbb{L}^2 \mid \psi = \psi_0 + \alpha(\psi_+ + U\psi_+)\}$$

donde $\psi_0 \in D^{(0)}(A)$, y α cualquier constante. Para el caso $d_+ = d_- = 1$ se tendrá que el operador U viene caracterizado por una fase, de modo que $U\phi_+ = e^{i\theta}\phi_-$, con $\theta \in [0, 2\pi)$, y entonces:

$$D_\theta(A) = \{\psi \in \mathbb{L}^2, A\psi \in \mathbb{L}^2 \mid \psi_0 + \alpha(\phi_+ + e^{i\theta}\phi_-)\}$$

Retomemos ahora el ejemplo del operador momento $P = -i\frac{d}{dx}$ [6] y consideremos el espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{L}^2[0, 1]$. Definimos el operador primero sobre el dominio

$$D^{(0)}(P) = \{f(x) \in \mathbb{L}^2, Pf(x) \in \mathbb{L}^2 \mid f(0) = f(1) = 0\}$$

Con estas condiciones ya hemos visto antes que P es un operador simétrico pero no autoadjunto ya que para todo par de funciones $f_1, f_2 \in D(P)$ se cumple que $\langle f_1 | Pf_2 \rangle = \langle Pf_1 | f_2 \rangle$, pero es inmediato ver que $D(P^\dagger)$ es el conjunto de funciones que cumplen $\{f(x) \in \mathbb{L}^2, Pf(x) \in \mathbb{L}^2\}$. De modo que, en este caso, $D(P) \subset D(P^\dagger)$.

Surge naturalmente la pregunta de si no habremos restringido demasiado el dominio $D(P)$ inicialmente elegido, y por eso P no ha resultado autoadjunto. Veremos que, en efecto, es lo que ha ocurrido. Hallamos ahora los índices de defecto d_\pm resolviendo la ecuación espectral

$$-i\frac{d\psi(x)}{dx} = \pm i\lambda\psi(x)$$

donde $\phi_\pm \in D(P^\dagger)$ y donde el parámetro real $\lambda > 0$ se ha introducido para dar consistencia dimensional a la ecuación (aunque generalmente se toma como la unidad). Las soluciones debidamente normalizadas son

$$\begin{aligned}\phi_+(x) &= \left(\frac{\lambda}{\sinh(\lambda)}\right)^{1/2} e^{\lambda/2} e^{-\lambda x} \\ \phi_-(x) &= \left(\frac{\lambda}{\sinh(\lambda)}\right)^{1/2} e^{-\lambda/2} e^{\lambda x}\end{aligned}$$

de modo que los índices de defecto son $d_+ = d_- = 1$ y por tanto existen infinitas extensiones autoadjuntas caracterizadas por un parámetro θ . Para construirlas, definiremos el dominio:

$$D(P) = \{\psi \in \mathbb{L}^2, P\psi \in \mathbb{L}^2 \mid \psi = \psi_0 + \alpha(\phi_+ + e^{i\theta}\phi_-)\}$$

donde $\psi_0 \in D^{(0)}(P)$, α es una constante y $\theta \in [\theta, 2\pi)$. De esta forma, si $\psi \in D(P)$ entonces

$$\frac{\psi(1)}{\psi(0)} = \frac{e^{-\lambda/2} + e^{i\theta}e^{\lambda/2}}{e^{\lambda/2} + e^{i\theta}e^{-\lambda/2}}$$

de modo que

$$\left|\frac{\psi(1)}{\psi(0)}\right| = 1 \rightarrow \psi(1) = e^{i\mu}\psi(0)$$

con $\mu \in [0, 2\pi)$ y, por tanto, definitivamente nos queda que también podemos caracterizar a todas las extensiones autoadjuntas de P por un parámetro real μ tal que:

$$D_\mu(P) = \{\phi \in \mathbb{L}^2, P\phi \in \mathbb{L}^2 \mid \phi(1) = e^{i\mu}\phi(0)\}$$

Definido en ese dominio, P es un operador autoadjunto con valores propios

$$P_n = 2\pi n + \mu \quad n \in \mathbb{Z}$$

y sus vectores propios son:

$$\phi_n(x) = e^{i(2\pi n + \mu)x}$$

El espectro del operador P depende de la extensión en la que está definido a través de su dependencia con μ . Si se quiere ver esto en función de los parámetros originales (θ, λ) de los subespacios de defecto, puede hacerse a través de la igualdad

$$e^{i\mu} = \frac{e^{-\lambda/2} + e^{i\theta}e^{\lambda/2}}{e^{\lambda/2} + e^{i\theta}e^{-\lambda/2}}$$

por lo que vemos que, una vez fijado el espectro (fijado μ), el parámetro θ pasa a ser una función de μ y λ , es decir $\theta = \theta(\lambda, \mu)$ que es la ecuación del grupo de renormalización para el parámetro θ y nos dice como hay que cambiar θ al trabajar con otra λ si se quiere mantener el mismo espectro. En concreto, en este caso que acabamos de ver, es fácil obtener que la función Beta vale

$$\beta(\theta, \lambda) = \lambda \frac{d\theta}{d\lambda} = -\lambda \frac{\text{sen}(\theta)}{\text{senh}(\lambda)}$$

3. Extensiones autoadjuntas del Hamiltoniano de Coulomb.

Como ya hemos mencionado, nuestro objetivo es encontrar todas las posibles extensiones autoadjuntas del Hamiltoniano de Coulomb, y para ello tenemos que resolver exactamente la ecuación $H\psi_{\pm} = \pm i\psi_{\pm}$ para el átomo de hidrógeno. En este trabajo utilizaremos el método de los índices de defecto de Von Neumann.

Consideramos, pues, un electrón situado en una región del espacio sometida a un potencial central creado por una carga puntual $Q = Z|e|$. El Hamiltoniano asociado a este sistema es

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{\beta}{r}$$

El parámetro β es Ze^2 , m es la masa del electrón, \hbar es la constante de Planck reducida y r la coordenada radial.

Consideremos el problema en D dimensiones. El laplaciano en coordenadas esféricas tiene la expresión

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^{D-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{D-1} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2(\theta_1, \theta_2, \dots)$$

donde L^2 es el operador momento angular al cuadrado, el cual tiene como valores propios

$$l(l + D - 2)\hbar^2$$

Si trabajamos con funciones de onda factorizadas en una función radial y una angular, e introducimos la expresión de L^2 en el operador H nos queda en cada subespacio de momento angular l bien definido

$$H_r^{(l)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^{D-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{D-1} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l + D - 2)}{r^2} \right\} - \frac{\beta}{r}$$

Esta expresión es clave puesto que nos elimina la dependencia para las coordenadas angulares en los estados puros, yendo únicamente en función de la coordenada radial. A esta forma del Hamiltoniano le llamamos Hamiltoniano radial, y es un operador de gran importancia de cara a resolver el problema que nos estamos planteando. El espacio de Hilbert que estamos considerando en este caso consiste en el resultante de la suma directa de los subespacios que constituyen las funciones propias de cada l

$$\mathcal{H} = \oplus \mathcal{H}^{(l)}$$

Lo siguiente que haremos será, con este Hamiltoniano, resolver la ecuación espectral

$$H_r^{(l)} \varphi_{\pm} = \pm i \Lambda_0 \varphi_{\pm}$$

Donde hemos omitido un superíndice (l) en las funciones φ_{\pm} que nos ahorraremos por comodidad y donde $\varphi_{\pm} \in D(H^{\dagger})$. Notar que φ_{\pm} es la parte radial de la función de onda, puesto que estamos trabajando con un Hamiltoniano que solo depende de r .

A continuación, hacemos un cambio de variable e introducimos una serie de parámetros para adimensionalizar la ecuación:

$$x = \alpha_0 r$$

$$\frac{2\Lambda_0 m}{\hbar^2 \alpha_0^2} = \frac{1}{4}$$

$$\lambda = \frac{2m\beta}{\hbar^2\alpha_0}$$

Siendo α_0 una constante con unidades de $longitud^{-1}$.

De este modo, las ecuaciones para la parte radial

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^{D-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{D-1} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+D-2)}{r^2} \right\} - \frac{\beta}{r} \right] \varphi_{\pm}(r) = \pm i\Lambda_0 \varphi_{\pm}(r)$$

quedan ahora

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\alpha_0^2}{x^{D-1}} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{D-1} \frac{\partial}{\partial x} \right) - \alpha_0^2 \frac{l(l+D-2)}{x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\beta\alpha_0}{x} \right\} \varphi_{\pm}(x) = \pm i\Lambda_0 \varphi_{\pm}(x)$$

Multiplicando ambos miembros por $2m/\hbar^2$ y pasando el factor α_0^2 al segundo miembro

$$\left\{ -\frac{1}{x^{D-1}} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{D-1} \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{l(l+D-2)}{x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\beta}{\alpha_0 x} \right\} \varphi_{\pm}(x) = \pm i \frac{2m\Lambda_0}{\hbar^2\alpha_0^2} \varphi_{\pm}(x)$$

Observando el factor que acompaña a la dependencia con x^{-1} y el autovalor de φ_{\pm} , vemos al fijarnos en las definiciones anteriores que se corresponden, respectivamente, con $1/4$ y con el parámetro λ . La ecuación queda, finalmente

$$\left\{ -\frac{1}{x^{D-1}} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{D-1} \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{l(l+D-2)}{x^2} - \frac{\lambda}{x} \right\} \varphi_{\pm}(x) = \pm \frac{i}{4} \varphi_{\pm}(x)$$

Definimos ahora la función $R(x)$

$$\varphi_{\pm}(x) = x^{-\frac{D-1}{2}} R_{\pm}(x)$$

Este cambio está relacionado con la expresión de la normalización de la función de onda radial y nos aporta cierta comodidad en este aspecto ya que $\varphi(x)$ cumpliría

$$\int_0^{+\infty} \varphi^*(x) \varphi(x) x^{D-1} dx = 1$$

Mientras que si trabajamos con $R(x)$ esto se simplifica

$$\int_0^{+\infty} x^{-\frac{D-1}{2}} R^*(x) x^{-\frac{D-1}{2}} R(x) x^{D-1} dx = \int_0^{+\infty} R^*(x) R(x) dx = 1$$

Por tanto, se trata ahora de reducir la expresión

$$\left\{ -\frac{1}{x^{D-1}} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{D-1} \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{l(l+D-2)}{x^2} - \frac{\lambda}{x} \right\} x^{-\frac{D-1}{2}} R_{\pm}(x) = \pm \frac{i}{4} x^{-\frac{D-1}{2}} R_{\pm}(x)$$

En el primer miembro tenemos tres sumandos. El primero es

$$-\frac{1}{x^{D-1}} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^{D-1} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{-\frac{D-1}{2}} R_{\pm}(x) \right) \right]$$

Lo desarrollamos por partes

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(x^{-\frac{D-1}{2}} R_{\pm}(x) \right) = R_{\pm}(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{-\frac{D-1}{2}} \right) + x^{-\frac{D-1}{2}} \frac{\partial R_{\pm}(x)}{\partial x} = -R_{\pm}(x) \frac{D-1}{2} x^{-\frac{D+1}{2}} + x^{-\frac{D-1}{2}} \frac{\partial R_{\pm}(x)}{\partial x}$$

Añadimos x^{D-1} y volvemos a derivar

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[x^{D-1} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{-\frac{D-1}{2}} R_{\pm}(x) \right) \right] = x^{\frac{D-1}{2}} \frac{\partial^2 R_{\pm}(x)}{\partial x^2} - \frac{(D-1)(D-3)}{4} R_{\pm}(x) x^{\frac{D-5}{2}}$$

Finalmente, el primer sumando queda

$$-\frac{1}{x^{D-1}} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^{D-1} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{-\frac{D-1}{2}} R_{\pm}(x) \right) \right] = -x^{-\frac{D-1}{2}} \frac{\partial^2 R_{\pm}(x)}{\partial x^2} + \frac{(D-1)(D-3)}{4} R_{\pm}(x) x^{-\frac{D+3}{2}}$$

Añadiendo el resto de la ecuación y multiplicandola por $x^{(D-1)/2}$ llegamos a

$$-\left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(l(l+D-2) + \frac{(D-1)(D-3)}{4} \right) \frac{1}{x^2} - \frac{\lambda}{x} \right\} R_{\pm}(x) = \pm \frac{i}{4} R_{\pm}(x)$$

Que es una expresión mucho más manejable puesto que hemos desacoplado todas las derivadas y productos con potencias de x que teníamos encadenados antes y ha quedado simplificado a una derivada segunda respecto de la coordenada x , una dependencia con x^{-2} y una con x^{-1} .

Definiendo $d = \frac{D}{2} - 1$ y teniendo en cuenta que

$$l(l+D-2) + \frac{(D-1)(D-3)}{4} = l^2 + 2dl + d^2 - \frac{1}{4} = (l+d)^2 - \frac{1}{4}$$

la ecuación total queda

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{(l+d)^2 - 1/4}{x^2} - \frac{\lambda}{x} \right\} R_{\pm}(x) = \pm \frac{i}{4} R_{\pm}(x)$$

En este punto, realizamos un nuevo cambio de variable pasando a una variable compleja que resulta de añadirle a x una fase de $\mp \frac{\pi}{4}$, donde se usará el signo $-$ cuando se trate de R_+ y el signo $+$ cuando se trate de R_- , es decir

$$z_{\pm} = e^{\mp \frac{i\pi}{4}} x$$

Vamos a expresar ahora la ecuación anterior utilizando la variable z . Desarrollando los términos, pasando el primer miembro el sumando $\pm \frac{i}{4} R_{\pm}$ y multiplicando todo por $e^{\pm i\pi/2}$ queda

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial z_{\pm}^2} + \frac{(l+d)^2 - 1/4}{z_{\pm}^2} - e^{\pm i\pi/4} \frac{\lambda}{z_{\pm}} \mp e^{\pm i\pi/2} \frac{i}{4} \right) R_{\pm}(z_{\pm}) = 0$$

Analizando el término $\mp i e^{\pm i\pi/2} / 4$ vemos que este se reduce a $1/4$ en los dos casos. Así, finalmente se llega a la ecuación

$$\left(\frac{d^2}{dz_{\pm}^2} - \frac{(l+d)^2 - 1/4}{z_{\pm}^2} + \frac{\lambda e^{\pm i\pi/4}}{z_{\pm}} - \frac{1}{4} \right) R_{\pm}(z_{\pm}) = 0 \quad (1)$$

Que corresponde a una ecuación diferencial de Whittaker, que es de la forma [7]

$$\frac{d^2 w(z)}{dz^2} + \left[\frac{1/4 - \mu^2}{z^2} + \frac{\kappa}{z} - \frac{1}{4} \right] w(z) = 0$$

si identificamos $\kappa = \lambda e^{\pm i\pi/4}$ y $\mu = l + d$.

En el límite de pequeñas distancias al origen ($z \rightarrow 0$) la ecuación diferencial se reduce a

$$\left(\frac{d^2}{dz_{\pm}^2} - \frac{(l+d)^2 - 1/4}{z_{\pm}^2} \right) R_{\pm}(z_{\pm}) = 0$$

Puesto que los términos que dominan son la derivada segunda y la dependencia con z^{-2} , término mucho mayor que el sumando con z^{-1} cerca del origen.

Volviendo a la ecuación general, existen dos soluciones que satisfacen dicha igualdad: son las funciones de Whittaker $M_{\kappa,\mu}(z)$ y $W_{\kappa,\mu}(z)$, cuya expresión es

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_{\kappa,\mu}(z) &= e^{-z/2} z^{1/2+\mu} M\left(\frac{1}{2} + \mu - \kappa, 1 + 2\mu, z\right) \\ \mathcal{W}_{\kappa,\mu}(z) &= e^{-z/2} z^{1/2+\mu} U\left(\frac{1}{2} + \mu - \kappa, 1 + 2\mu, z\right)\end{aligned}$$

donde M y U son las funciones hipergeométricas confluyentes.

Para que estas soluciones puedan ser funciones de onda, tienen que ser normalizables.

Empecemos analizando $\mathcal{M}_{\kappa,\mu}(z_{\pm})$ y veamos como se comporta en el infinito.

Cuando $|z| \rightarrow \infty$ sigue una dependencia de la forma

$$M(a, b, z_{\pm}) \sim z_{\pm}^{-a} + e^{z_{\pm}} z_{\pm}^{a-b}$$

Cuando $Re(z) > 0$ la función de Whittaker \mathcal{M} se comporta como

$$\mathcal{M}_{\kappa,\mu}(z_{\pm}) \sim e^{-\frac{1}{2}z_{\pm}} e^{z_{\pm}} = e^{z_{\pm}/2}$$

Recordando como hemos definido z, descomponemos la exponencial anterior

$$e^{z_{\pm}/2} = e^{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}x \pm \frac{i}{\sqrt{2}}x\right)} = e^{\frac{1}{2\sqrt{2}}x} \left(\cos \frac{x}{2\sqrt{2}} \pm i \sin \frac{x}{2\sqrt{2}} \right)$$

Valores de z grandes implican valores de x grandes y la exponencial anterior tiende a infinito. Así, $\mathcal{M}_{\kappa,\mu}(z_{\pm})$ diverge para $z_{\pm} \rightarrow \infty$, con lo que esta solución no es normalizable y por lo tanto debe excluirse.

Sigamos ahora estudiando los casos límites de la función \mathcal{W} de Whittaker. En el límite de $|z| \rightarrow \infty$, la función hipergeométrica U va como

$$U(a, b, z_{\pm}) \sim z_{\pm}^{-a}$$

Por lo que la función \mathcal{W} exhibe una dependencia de la forma

$$\mathcal{W}_{\kappa,\mu}(z_{\pm}) \sim e^{-z_{\pm}/2} z_{\pm}^{\frac{1}{2}+\mu} z_{\pm}^{-\frac{1}{2}-\mu+\kappa} = e^{-z_{\pm}/2} z_{\pm}^{\kappa} \sim e^{-z_{\pm}/2}$$

En el último paso se ha tenido en cuenta que la exponencial domina sobre la función potencial en la región en la que estamos trabajando. La exponencial se puede desarrollar como

$$e^{-z_{\pm}/2} = e^{-\frac{1}{2\sqrt{2}}x} \left(\cos \frac{x}{2\sqrt{2}} \pm \sin \frac{x}{2\sqrt{2}} \right)$$

Esta expresión tiende a 0 cuando x es muy grande.

Veamos ahora como se comporta cerca del origen. En este entorno, U tiene una dependencia

$$U(a, b, z_{\pm}) \sim z_{\pm}^{1-b}$$

Entonces, la función total va como

$$\mathcal{W}_{\kappa,\mu}(z_{\pm}) \sim e^{-z_{\pm}/2} z_{\pm}^{\frac{1}{2}+\mu} z_{\pm}^{1-b} = z_{\pm}^{\frac{1}{2}+\mu} z_{\pm}^{-2\mu} = z_{\pm}^{-(l+d)+\frac{1}{2}}$$

Si particularizamos para el caso $D = 3$ o lo que es lo mismo, para $d = \frac{1}{2}$, nos queda que

$$\mathcal{W} \sim z_{\pm}^{-l}$$

Entonces, para $l > 0$ $\mathcal{W}_{\kappa,\mu}$ no es normalizable (recordar que ahora la condición de normalización es $\int_0^{+\infty} |R_{\pm}|^2 dr < \infty$). El único caso para el cual z_{\pm}^{-l} es regular en el origen y la podemos normalizar es cuando $l = 0$, que tiende a una constante. Si lo pensamos en términos de la función φ asociada, esta se comporta en esta región como $1/r$ pero es normalizable. Esta consideración es clave en nuestro planteamiento, ya que los desarrollos convencionales no tienen en cuenta esta solución, como adelantamos en la introducción. Entonces, las dos funciones que además de satisfacer la ecuación espectral cumplen el requisito de normalización necesario para ser funciones de onda con $l = 0$ son

$$\begin{aligned} R_+ &= N_1 z e^{-z_+/2} U(1 - \lambda e^{i\pi/4}, 2, z_+) \\ R_- &= N_2 z e^{-z_-/2} U(1 - \lambda e^{-i\pi/4}, 2, z_-) \end{aligned}$$

Donde N_1 y N_2 son dos constantes de normalización, que luego demostraremos que son la misma, salvo una fase global.

Nótese además que la variable radial con la que trabajamos no es exactamente la misma para las dos funciones, puesto que al hacer el cambio de variable de x a z hemos introducido una fase distinta para las soluciones R_+ y R_- . Este detalle lo tendremos que tener en cuenta en cálculos posteriores.

Podemos comprobar fácilmente que esos son los puntos donde tenemos que evaluar la función hipergeométrica U ya que el primer parámetro es $a = \frac{1}{2} + \mu - \kappa$ y el segundo es $b = 1 + 2\mu$. En nuestro desarrollo, $\mu = \frac{1}{2}$ y $\kappa = \lambda e^{i\pi/4} \equiv \kappa_+$ para R_+ y $\kappa = \lambda e^{-i\pi/4} \equiv \kappa_-$ para R_- .

Como se ha anticipado antes, la constante de normalización es la misma, pues tenemos que

$$\begin{aligned} H R_+ &= i \Lambda_0 R_+ \\ H R_- &= -i \Lambda_0 R_- \end{aligned}$$

Entonces, como el conjugado de H es el mismo H

$$H R_+^* = -i \Lambda_0 R_+^*$$

Por tanto, vemos que R_+^* es proporcional a R_- , pero como ambas funciones tienen que estar normalizadas a 1, tiene que ser $|R_+^*| = |R_-|$. Como una función y su conjugada tienen la misma norma, ambas tienen que tener la misma constante de normalización, y R_+ y R_- también cumplen esto. Así, salvo una fase global

$$\begin{aligned} R_+ &= N \mathcal{W}_{\kappa_+, 2}(z_+) \\ R_- &= N \mathcal{W}_{\kappa_-, 2}(z_-) \end{aligned}$$

Pasamos a analizar los índices de defecto y a construir las extensiones autoadjuntas dentro del subespacio con $l = 0$. La dimensión de los subespacios engendrados por R_+ y R_- es

$$d_+ = d_- = 1$$

Vemos que $d_+ = d_- \neq 0$, por lo que el Hamiltoniano para el caso en el que $l = 0$ admite infinitas extensiones autoadjuntas.

Si $d_+ = d_- = 1$, el operador U que nos define las isometrías entre R_+ y R_- viene descrito por una fase, y ambas se relacionan como $U R_+ = e^{i\theta} R_-$, siendo θ un parámetro libre que

puede tomar valores en $(0, 2\pi]$. Por lo tanto, tenemos que todas las posibles extensiones autoadjuntas de H vienen dadas por los dominios definidos por

$$D_\theta = \{f \in L^2, Hf \in \mathbb{L}^2 \mid f = f_0 + \alpha(R_+ + e^{i\theta}R_-)\}$$

siendo f_0 una función perteneciente a un dominio de soporte compacto, $D^{(0)}$. Recordamos que, por definición, un dominio de soporte compacto supone unas condiciones de contorno en la frontera del espacio soporte $f(0) = f(\infty) = 0$.

Se puede demostrar que también podemos caracterizar todas las extensiones autoadjuntas de H utilizando un parámetro real $\nu \in \mathbb{R}$ de la siguiente forma

$$D_\nu = \{g \in \mathbb{L}^2, Hg \in \mathbb{L}^2 \mid \nu g_{0,\lambda} = g_{1,\lambda}\} \quad (2)$$

donde $g_{0,\lambda}$ y $g_{1,\lambda}$ son valores de frontera definidos para nuestro caso como

$$g_{0,\lambda} = \lim_{x \rightarrow 0} g(x)$$

$$g_{1,\lambda} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{g(x) - g_{0,\lambda}G_1^B(x)}{x}$$

que coinciden con la expresión que aparece en el apéndice D de [1].

La función G_1^B se particulariza para ondas s y en el potencial como el que estamos considerando en la expresión

$$G_1^B(x) = 1 - \lambda x \ln x + \frac{\lambda}{2}x$$

Para comprobar que ambas definiciones de los dominios nos caracterizan correctamente las extensiones autoadjuntas, estudiemos más a fondo las condiciones de contorno del dominio D_θ y veamos bajo qué condición los dominios son equivalentes.

En el límite $z \rightarrow \infty$, las funciones Whittaker tienden a 0, como hemos visto, por lo que las funciones f se anulan también.

Cerca del origen, las funciones Whittaker \mathcal{W} se comportan siguiendo una dependencia

$$\mathcal{W}_{\kappa,\mu=1/2}(z) = -\frac{1}{\kappa\Gamma(-\kappa)} \left\{ -1 + \kappa z \ln z + \frac{1}{2} [1 + \kappa(-2 + 4\gamma_E + \Psi(0, 1 - \kappa))] z \right\}$$

donde γ_E es la constante de Euler y Ψ es la función poligamma [7].

Ya que R_+ y R_- tienen como variable independiente, respectivamente, z_+ y z_- , para poder analizar la dependencia de f cerca de 0, tendremos que deshacer en el cambio y expresar la función según la variable x . Haciendo esto para $\mathcal{W}_{\kappa_+,1/2}$ se llega a

$$\mathcal{W}_{\kappa_+,1/2}(x) = -\frac{1}{\kappa_+\Gamma(-\kappa_+)} \left\{ -1 - \frac{i\pi}{4}\lambda x + \lambda x \ln x + \frac{x e^{-i\pi/4}}{2} [1 + \kappa_+(-2 + 4\gamma_E + \Psi(0, 1 - \kappa_+))] \right\}$$

Con $\mathcal{W}_{\kappa_-,1/2}$ queda

$$\mathcal{W}_{\kappa_-,1/2}(x) = -\frac{1}{\kappa_-\Gamma(-\kappa_-)} \left\{ -1 + \frac{i\pi}{4}\lambda x + \lambda x \ln x + \frac{x e^{i\pi/4}}{2} [1 + \kappa_-(-2 + 4\gamma_E + \Psi(0, 1 - \kappa_-))] \right\}$$

La función f , que recordemos es

$$f = f_0 + \alpha(R_+ + e^{i\theta}R_-)$$

Se comportará en el origen como

$$f(x \rightarrow 0) = R_+(x \rightarrow 0) + e^{i\theta} R_-(x \rightarrow 0)$$

Y vemos que también se puede expresar como

$$f(x \rightarrow 0) = C_1 (A_0 + A_1 x \ln x + A_2 x)$$

A_0, A_1 y A_2 son constantes reales y C_1 es una constante compleja.

Comprobemos que la dependencia realmente es así y hallemos la relación entre las constantes.

A la vista de los resultados anteriores, podemos identificar $C_1 A_0$

$$C_1 A_0 = -\frac{1}{\kappa_+ \Gamma(-\kappa_+)} - \frac{e^{i\theta}}{\kappa_- \Gamma(-\kappa_-)} = -\frac{1}{\lambda} \left(\frac{e^{-i\pi/4}}{\Gamma(-e^{i\pi/4}\lambda)} + \frac{e^{i\theta} e^{i\pi/4}}{\Gamma(-e^{-i\pi/4}\lambda)} \right)$$

Y $C_1 A_1$ es

$$C_1 A_1 = \frac{1}{e^{i\pi/4} \Gamma(-e^{i\pi/4}\lambda)} + \frac{e^{i\theta}}{e^{-i\pi/4} \Gamma(-e^{-i\pi/4}\lambda)}$$

Con estos resultados obtenemos la relación entre A_1 y A_0

$$\frac{A_1}{A_0} = -\lambda$$

En cuanto a A_2 , se puede probar que

$$\frac{A_2}{A_0} = b(\theta)$$

siendo $b(\theta)$ una función real del parámetro θ .

En consecuencia, la función f se comporta cerca del origen como habíamos mencionado.

Como hemos dicho antes, para que los dos dominios definidos sean iguales, las funciones asociadas a ellos deben tener las mismas condiciones de contorno. Entonces, las funciones g en torno a 0 irán como

$$g(x) \sim A_0 (1 + \lambda x \ln x + b x)$$

Entonces, los límites $g_{0,\lambda}$ y $g_{1,\lambda}$ son

$$g_0 = \lim_{x \rightarrow 0} g(x) = A_0$$

$$g_1 = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{g(x) - g_0 G_\lambda^B(x)}{x} = A_0 \left(b + \frac{\lambda}{2} \right)$$

Llegamos a que la relación entre los ν y θ asociados a los mismos dominios autoadjuntos es

$$\nu = b(\theta) + \frac{\lambda}{2}$$

Es fundamental notar que los R_\pm que hemos obtenido para $l = 0$, salvo cuando $\nu = \infty$, lo que implica que $g_{0\lambda} = \lim_{r \rightarrow 0} g(r) = 0$, tienden a una constante en $r = 0$ y tienen asociadas unas funciones φ que se comportan como $\varphi \sim \frac{1}{r}$ en esta región. Así, las soluciones que hemos descrito se pueden interpretar como extensiones asociadas a la existencia de una interacción puntual de tipo $\delta^3(r)$, ya que $\nabla^2(\frac{1}{r}) \propto \delta(r)$.

Para el caso $l > 0$, ni las funciones de Whittaker \mathcal{M} ni las \mathcal{W} son normalizables, por lo que no existen soluciones de cuadrado integrable y por tanto $d_+ = d_- = 0$. En consecuencia, el Hamiltoniano resulta ser esencialmente autoadjunto definido sobre funciones de soporte compacto, de modo que para encontrar el $H^{(l)}$ que es autoadjunto solo hay que cerrarlo. Esto se hace tomando como $D(H^{(l)})$ funciones regulares en el origen, el cual es el dominio que se usa en los libros de Mecánica Cuántica.

4. El átomo de hidrógeno con interacción puntual.

El átomo de hidrógeno con interacción puntual aparece ya cuando se considera la corrección del término de Darwin sobre el átomo no relativista. Esto fue estudiado ya por Rellich [8] buscando un conjunto de soluciones a la ecuación de autovalores que fuesen ortogonales. Actualmente, la forma de tratar un potencial que se hace infinito en varios puntos es eliminar esos puntos del espacio soporte y sustituirlos por condiciones de contorno. Esto es lo que hace nuestro método para $l = 0$ en el origen.

En este punto, vamos a determinar ya el espectro de energías asociado al Hamiltoniano definido en los nuevos dominios con los que estamos trabajando. Para ello, partimos de la ecuación

$$H\varphi = E_n\varphi$$

E_n es, evidentemente la energía del estado φ . Puesto que estamos buscando los estados ligados, $E_n < 0$. Sin embargo, por comodidad, en lo que siga cuando escribamos E_n nos estaremos refiriendo en realidad a $|E_n|$. Queda, entonces

$$H\varphi = -E_n\varphi$$

El Hamiltoniano es, por supuesto, el Hamiltoniano de Coulomb que ya hemos planteado anteriormente. Este desarrollo lo particularizaremos a tres dimensiones para simplificar la notación, puesto que este además el caso que nos atañe. Llegamos a la ecuación radial

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{\beta}{r} \right\} \varphi(r) = -E_n\varphi(r)$$

Ya hemos visto que para $l > 0$ este Hamiltoniano es esencialmente autoadjunto siendo las condiciones regulares en el origen (y la anulación en $r \rightarrow \infty$) la única extensión autoadjunta admisible.

Adimensionalizamos ahora con el cambio de variable y definimos las constantes

$$\begin{aligned} x &= \alpha_0 r \\ \frac{2mE_n}{\hbar^2\alpha_0^2} &= \frac{1}{4} \\ \lambda &= \frac{2m\beta}{\hbar^2\alpha_0} \end{aligned} \tag{3}$$

Con lo que la ecuación radial queda

$$\left\{ -\frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{d}{dx} \right) + \frac{l(l+1)}{x^2} - \frac{\lambda}{x} \right\} \varphi(x) = -\frac{1}{4}\varphi(x)$$

Por último, definimos la función R

$$\varphi(x) = \frac{R(x)}{x}$$

Con la que la ecuación se reduce a

$$\frac{d^2 R(x)}{dx^2} + \left[-\frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{\lambda}{x} - \frac{1}{4} \right] R(x) = 0$$

De acuerdo con lo dicho antes, los autoestados con $l > 0$ son los habituales que se obtienen con condiciones regulares en el origen. En cambio cuando $l = 0$

$$\frac{d^2 R(x)}{dx^2} + \left[\frac{\lambda}{x} - \frac{1}{4} \right] R(x) = 0$$

Es fácil ver que estamos ante una ecuación de Whittaker con $\mu = \frac{1}{2}$ y $\kappa = \lambda$. La solución compatible con los requisitos de las funciones de onda es

$$R(x) = \mathcal{W}_{\lambda, 1/2}(x) = xe^{-x/2}U(1 - \lambda, 2, x)$$

Estas funciones $R(x)$ pertenecen a $D(H)$. Por tanto, cumplirán que $\nu R_0 = R_1$. $R(x)$ en el límite $x \rightarrow 0$ sigue la dependencia

$$R(x) \simeq -\frac{1}{\lambda\Gamma(-\lambda)} + \frac{x \ln x}{\Gamma(-\lambda)} + \frac{x}{2\lambda\Gamma(-\lambda)} + \frac{-2 + 4\gamma_E + \Psi(0, 1 - \lambda)}{2\Gamma(-\lambda)}x$$

Los valores de contorno R_0 y R_1 son

$$R_0 = \lim_{x \rightarrow 0} R(x) = -\frac{1}{\lambda\Gamma(-\lambda)}$$

$$R_1 = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{R(x) - R_0 G_1^B(x)}{x} = -\frac{1}{\lambda\Gamma(-\lambda)} \left\{ \lambda \left(-\frac{3}{2} + 2\gamma_E + \frac{1}{2}\Psi(0, 1 - \lambda) \right) \right\}$$

Para el cálculo de R_1 hemos usado la expresión de $G_1^B(x)$ dada anteriormente, que sigue teniendo validez.

Habíamos dicho que estas funciones cumplían $\nu R_0 = R_1$ y, precisamente, el factor $\frac{1}{\lambda\Gamma(-\lambda)}$ que aparece en la expresión de R_1 se corresponde con R_0 . Por lo tanto, identificamos ν como

$$\nu = \lambda \left(-\frac{3}{2} + 2\gamma_E + \frac{1}{2}\Psi(0, 1 - \lambda) \right) \quad (4)$$

Este requerimiento de las funciones $R(x)$ es una importante regla de cuantización con la que podremos obtener el espectro de energías de estas funciones de onda.

Para esto, necesitamos hallar una expresión más: la que nos da la variable energía, E_n como función de λ . A esta llegamos fácilmente a partir de la definición dada de estos parámetros en (3). Si despejamos α_0 de la segunda igualdad y la introducimos en la tercera se llega, retomando que la energía es menor que 0, a

$$E_n = -m \frac{Ze^2}{\hbar^2} \frac{1}{2\lambda_n^2} \quad (5)$$

Obsérvese la analogía de esta ecuación con la de las energías de Schrödinger $E_n = -m \frac{Ze^2}{\hbar^2} \frac{1}{2n^2}$, sin más que reemplazar n por la solución λ_n de la ecuación (4).

Representando la expresión (4), obtenemos la gráfica

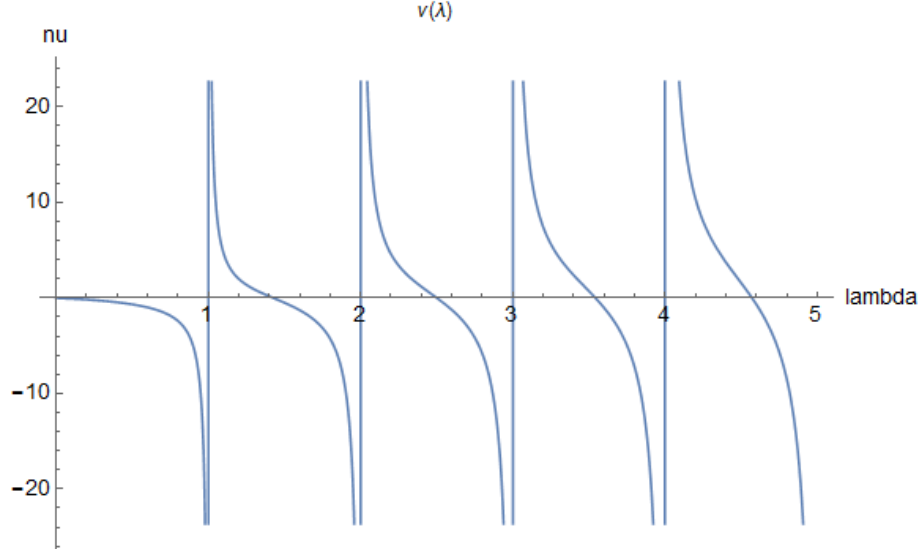


Figura 1: Relación entre λ y el parámetro ν , que nos caracteriza las infinitas extensiones autoadjuntas.

Observamos que se trata de una función con indeterminaciones en los enteros positivos, donde vemos que diverge a $+\infty$ y $-\infty$.

Esta representación nos permite hallar cuáles son los λ correspondientes a un ν . Para ello, trazáramos una línea horizontal a la altura de ese ν y los cortes con la función nos darían, al proyectarlos sobre el eje de abscisas, los λ asociados. Tendríamos un valor de λ por cada intervalo entre dos enteros $(n, n + 1)$. Entonces, introduciendo estos λ en la ecuación (5), tendríamos los valores de energía correspondientes a nuestro ν .

Un caso particularmente interesante es el límite $\nu \rightarrow \infty$, para el que λ toma como valores los enteros positivos ($\lambda = 1, 2, 3, \dots$). La ecuación de la energía es, entonces

$$E_n = -m \frac{Ze^2}{\hbar^2} \frac{1}{2n^2}, \quad n \in \mathbb{N}$$

y vemos que recuperamos la expresión ya conocida de la energía como función inversamente proporcional al cuadrado de un índice n entero. Nótese que $\nu = \infty$ significa $g_{o,\lambda} = 0$ según (2) y por tanto que las funciones de onda son regulares. Así, concluimos que la extensión autoadjunta asociada a $\nu = \infty$ se corresponde con el planteamiento habitual que nos lleva a los resultados y expresión para el espectro de energías que ya conocemos.

Para profundizar en esta idea, computaremos la energía de varios ν y veremos como varían estos valores conforme lo hace ν . En concreto, lo haremos para $\nu = 0.001, 1, 30$ y 1000 , dando las cuatro primeras energías. Expresaremos las energías en unidades de E/K , siendo $K = \frac{m\beta^2}{2\hbar^2}$.

Para $\nu = 0.001$

λ_n	$E(\lambda)$
1.42772	-0.490583
2.5012	-0.159847
3.54285	-0.0796698
4.57122	-0.047856

Observamos que los λ_n se encuentran relativamente alejados del n correspondiente. Inicialmente están en torno a la mitad del intervalo, acercándose más a $n + 1$ conforme aumenta

n. Por tanto, estos λ son mayores que para los casos con ν más alto, con lo que los estados están menos ligados que los que veremos a continuación.

Para $\nu = 1$

λ_n	$E(\lambda)$
1.2911	-0.599902
2.41508	-0.17145
3.48301	-0.082431
4.52653	-0.0488055

En este caso, los λ_n siguen sin estar cerca de n pese a que hemos aumentado ν en tres órdenes de magnitud. Por tanto, en esta región grandes cambios en ν no implican valores resultantes de λ cercanos ya a los números enteros. Seguimos observando, como hemos razonado antes, que la ligadura de los niveles aumenta con ν .

Para $\nu = 30$

λ_n	$E(\lambda)$
1.01658	-0.967647
2.03349	-0.241833
3.05107	-0.107423
4.0695	-0.0603834

En este caso, aumentando ν un factor 30 se consiguen ya valores de λ muy cercanos a los números enteros. Para los que mostramos, vemos una diferencia máxima del 1.74 % para λ_4 . Los niveles de energía siguen haciéndose menores y son ya cercanos a los del caso límite $\nu = \infty$.

Para $\nu = 1000$

λ_n	$E(\lambda)$
1.0005	-0.999001
2.001	-0.24975
3.0015	-0.11100
4.002	-0.0624375

Para $\nu = 1000$, los λ_n ya casi coinciden con los números enteros, teniendo λ_4 una desviación del 0.05 % respecto a 4. Así, de aquí en adelante no se van a producir grandes cambios en la energía y la ligadura de los niveles es prácticamente la de los valores ampliamente conocidos.

Ya estamos preparados para obtener las energías exactas de los niveles del átomo de hidrógeno considerando el Hamiltoniano sin perturbar y el término de Darwin.

Para ello, necesitamos hallar la ν que corresponde a las energías reales y a partir de ella podemos dar el espectro de energías verdadero del átomo de hidrógeno cuando se incluye este término. Esto lo haremos calculando la corrección a la energía a primer orden, tratando el potencial de Darwin como una perturbación. Así, igualaremos este resultado a la expresión exacta para la energía (5), de donde podremos despejar λ . A partir de este λ , hallaremos el ν correspondiente con el que daremos el espectro de energías procediendo como en los ejemplos anteriores.

El término de Darwin tiene la forma

$$H_D(r) = 4\pi \frac{Ze^2\hbar^2}{8m^2c^2} \delta^3(r) = \frac{Ze^2\hbar^2}{8m^2c^2} \frac{1}{r^2} \delta(r)$$

siendo c la velocidad de la luz en el vacío.

Según teoría de perturbaciones, el valor de energía a primer orden es

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$$

donde $E_n^{(0)}$ es la energía del sistema sin considerar la perturbación y $E_n^{(1)}$ es la corrección de orden uno.

$E_n^{(0)}$ es, obviamente

$$E_n^{(0)} = -\frac{m}{2} \left(\frac{Ze^2}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$

Y $E_n^{(1)}$ viene dado por

$$E_n^{(1)} = \left\langle \psi_{nlm}^{(0)} \left| H_D \right| \psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle \quad (6)$$

siendo las $\psi_{nlm}^{(0)}$ las funciones de onda estándares para el átomo de hidrógeno, puesto que en este enfoque tenemos que usar las funciones de onda sin perturbar

$$\psi_{nlm}^{(0)} = R_{nl}(r) Y_m^l(\theta, \varphi)$$

Las funciones Y_m^l son los armónicos esféricos y R_{nl} se corresponde con la función radial, que recordemos es

$$R_{nl}(r) = \left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]} \right]^{1/2} \left(\frac{2Z}{n\alpha_0} \right)^{l+3/2} r^l e^{-\frac{Zr}{n\alpha_0}} \mathcal{L}_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{n\alpha_0} \right)$$

donde $\mathcal{L}_n^m(x)$ son los polinomios de Laguerre generalizados.

Computemos el elemento de matriz de $E_n^{(1)}$

$$E_n^{(1)} = \left\langle \psi_{nlm}^{(0)} \left| H_D \right| \psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle = \frac{Ze^2\hbar^2}{8m^2c^2} \langle R_{nl} | \frac{1}{r^2} \delta(r) | R_{nl} \rangle = \frac{Ze^2\hbar^2}{8m^2c^2} |R_{nl}(0)|^2 \delta_l^0 = -E_n^{(0)} \frac{Z^2e^4}{\hbar^2n}$$

Ya que en $r = 0$ las funciones radiales con $l = 0$ tienden a

$$R_{n0}(0) = \frac{2}{a^{3/2}n^{3/2}}$$

Donde $a = \frac{\hbar^2}{mZe^2}$.

Agrupando los dos términos, obtenemos la energía por teoría de perturbaciones

$$E_n^P = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} = E_n^{(0)} \left(1 - \frac{Z^2e^4}{\hbar^2n} \right) = E_n^{(0)} \left(1 - \frac{Z\alpha^2}{n} \right)$$

siendo α la constante de estructura fina.

Fijamos $Z = 1$, puesto que estamos tratando el átomo de hidrógeno y $n = 1$ por simplicidad e igualamos las dos expresiones que tenemos para la energía (lo que supone despreciar las correcciones de teoría de perturbaciones a segundo orden ya que son $\propto \alpha^4$)

$$E_1^P = E_1^{ex}$$

De esta ecuación despejamos λ_1 , correspondiente a la primera solución de (4)

$$\lambda_1 = (1 - \alpha^2)^{-1/2} = \frac{137}{4\sqrt{1173}} \simeq 1.000027$$

Donde se ha tomado $\alpha = 1/137$.

Utilizando la relación (4), encontramos el ν correspondiente

$$\nu = 18768.1158$$

Este es, pues, el valor verdadero que se observa para ν en el átomo de hidrógeno. Los primeros λ y niveles de energía asociados son

λ_n	$E(\lambda)$
1.000027	-0.999947
2.000053	-0.249987
3.000080	-0.111105
4.000107	-0.062497

Como era de esperar para un ν grande, los λ difieren mínimamente de los enteros. Para los cuatro primeros, vemos desviaciones máximas del 1 por 10000. Las energías son también muy cercanas a los valores de $1/n^2$.

Por último, compararemos el espectro obtenido mediante teoría de perturbaciones y el exacto que nosotros hemos hallado. Mostramos en la tabla algunos valores de diversos índices n .

Índice	E^{ex}	E^P
1	-0.999947	-0.999947
2	-0.249987	-0.25
10	-0.0099995	-0.01
50	-0.00039998	-0.0004
100	$-9.9995 \cdot 10^{-5}$	-0.0001

La energía para el estado fundamental es la misma en los dos casos, pero esto no podía ser de otra manera ya que para hallar ν hemos fijado $E_1^{ex} = E_1^P$. Sin embargo, debido a que el término que se añade por teoría de perturbaciones va como $\frac{\alpha}{n^3}$, por este método se obtienen correcciones mucho más pequeñas que las que aparecen para el caso exacto. Las energías halladas con la expresión exacta de nuestra memoria sí que difieren de los valores convencionales para todos los índices con los que hemos probado. Llega a corregir términos de índice tan alto como $n = 100$. Los resultados son, pues, razonables y coherentes con lo esperado. Podemos concluir que, efectivamente, el desarrollo que hemos llevado a cabo da cuenta del espectro exacto.

Destaca también que esta extensión autoadjunta rompe la simetría $SO(4)$ del problema de Coulomb, en la cual el espectro solo depende del número cuántico n y no depende de l . Vemos que con H definido en D_ν , la energía para el estado $(n, l \neq 0)$ es distinta de la energía del estado $(n, l = 0)$ si $\nu \neq \infty$. Nótese que todo esto es consistente con el hecho de que solo las ondas s sienten la interacción puntual en el origen.

5. Conclusiones

Hemos repasado la teoría de los índices de defecto de Von Neumann y la hemos aplicado para estudiar las extensiones autoadjuntas del Hamiltoniano de Coulomb. Las conclusiones finales son las siguientes

- Para $l \neq 0$, no existen soluciones normalizables para la ecuación que define los índices de defecto y, por tanto, $d_+ = d_- = 0$. El Hamiltoniano es, en este caso, esencialmente autoadjunto y, para hacerlo autoadjunto, solo hay que cerrarlo, lo que se hace tomando como dominio las funciones regulares en el origen. Este es el dominio en el que se resuelve normalmente el átomo de hidrógeno.
- Para $l = 0$, los índices de defecto resultan ser $d_+ = d_- = 1$, y el Hamiltoniano admite infinitas extensiones autoadjuntas. En este trabajo, hemos caracterizado los dominios en los que H es autoadjunto utilizando un parámetro ν , que determina la extensión D_ν .
- Las funciones de onda que satisfacen la ecuación espectral y son de cuadrado integrable para el caso $l = 0$ son las funciones de Whittaker $\mathcal{W}_{\kappa, \mu}(x)$. Estas soluciones corresponden a funciones radiales $\varphi(r)$ que divergen como $\varphi(r) \propto \frac{1}{r}$ en el origen pero que se pueden normalizar. Esta condición de contorno está asociada a la existencia de un potencial $\delta(r)$. Por tanto, dichas funciones se pueden interpretar como extensiones asociadas a la existencia de un potencial del tipo de Darwin en $r = 0$.
- Usando estas extensiones autoadjuntas hemos resuelto el espectro del átomo de hidrógeno con una interacción puntual. En este caso, la expresión exacta para las energías de las funciones correspondientes a $l = 0$ es

$$E_n = -m \frac{Ze^2}{\hbar^2} \frac{1}{2\lambda_n^2}$$

donde las λ_n se obtienen a partir de la exigencia de que las correspondientes autofunciones pertenezcan al dominio D_ν (ecuación 4).

- Cuando $\nu = \infty$, los valores posibles de λ_n son los números enteros positivos y por tanto se obtiene la expresión de Schrödinger para la energía. Así, el caso $\nu = \infty$ recupera la extensión autoadjunta habitual para el subespacio $l = 0$.
- Si se considera que la interacción puntual se corresponde con un término de Darwin, esto nos permite ajustar el parámetro de la extensión autoadjunta ν correspondiente a este caso fijando, por ejemplo, la energía del estado fundamental. Dado que la corrección del término de Darwin es pequeña y proporcional a $\frac{\alpha^2}{n^3}$ obtenemos que el correspondiente ν es muy grande ($\nu = 18768.1158$). Para $n > 1$ las energías son mayores en módulo cuando se toma teoría de perturbaciones que cuando se usa la solución exacta.
- Las extensiones autoadjuntas que se obtienen con $\nu \neq \infty$ rompen la simetría $SO(4)$ del problema de Coulomb. Ahora, el espectro no solo depende del número cuántico n ya que la energía para el estado $(n, l \neq 0)$ es distinta que la de $(n, l = 0)$.

Referencias

- [1] S. ALVEBERIO, F. GESZTESY, R. HOEGH-KROHN, H. HOLDEN y P. EXNER, *Solvable Models in Quantum Mechanics: Second Edition*, (AMS Chelsea Publishing, EEUU, 2005), págs. 371–373, ISBN 0-387-17841-4.
- [2] W. BULLA y F. GESZTESY, *Deficiency indices and singular boundary conditions in quantum mechanics*, J. Math. Phys. **26**, 2520 (1985); doi: 10.1063/1.526768.
- [3] A. GALINDO y P. PASCUAL, *Mecánica Cuántica (I)*, (Eudema Universidad, Fuenlabrada, 1989).
- [4] M. REED y B. SIMON, *Fourier Analysis, Self-Adjointness*, (Elsevier, 1975), ISBN 9780125850025.
- [5] C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU y F. LALOE, *Quantum Mechanics, Volume 1*, (John Wiley & Sons Inc, 1977), ISBN 13:9780471164326.
- [6] J.V. GARCÍA ESTEVE, *Apuntes asignatura Mecánica Cuántica*, 2018.
- [7] M. ABRAMOWITZ y I.A. STEGUN, *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover Publications Inc, Nueva York), ISBN 13:9781614276173.
- [8] F. RELICH, *Die Zulässigen Randbedingungen bei den singulären Eigenwert problem der mathematischen Physik*, Math. Z. 49 (1943/44), pp. 702–723.